4.3 Ein- und Mehrteilchen-Operatoren

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

4.3 Ein- und Mehrteilchen-Operatoren

- Beispiel: $H = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\underbrace{\frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}} + \underbrace{U(\vec{x}_\alpha)} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \underbrace{V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)}$

  $\uparrow$ $\uparrow$ Einteilchen-Operatoren $\uparrow$ Zweiteilchen-Operator

4.3 Ein- und Mehrteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $$H = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\underset{\substack{\uparrow}}{\frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}} + \underset{\substack{\uparrow}}{U(\vec{x}_\alpha)} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \underset{\substack{\uparrow}}{V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)}$$

  Einteilchen-Operatoren Zweiteilchen-Operator

  Wie lässt sich H mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken?

4.3 Ein- und Mehrteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $H = \sum_{\alpha=1}^{N} \Big(\underset{\uparrow}{\frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}} + \underset{\uparrow}{U(\vec{x}_\alpha)} \Big) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \underset{\uparrow}{V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)}$

  Einteilchen-Operatoren Zweiteilchen-Operator

  Wie lässt sich H mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken?

1. Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha$ (z.B. $\hat{t}_\alpha = \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}$)

4.3 Ein- und Mehrteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $H = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} + U(\vec{x}_\alpha) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$

  $\uparrow$ $\uparrow$ Einteilchen-Operatoren $\qquad$ $\uparrow$ Zweiteilchen-Operator

  Wie lässt sich H mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken?

1. Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha$ $\qquad$ (z.B. $\hat{t}_\alpha = \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}$)

- Betrachte zunächst ein Einteilchen-System ($N = 1$) $\quad \longrightarrow \quad \hat{t}_\alpha = \hat{t}_1 \equiv \hat{t}$

4.3 Ein- und Mehrteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $H = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} + U(\vec{x}_\alpha) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$

  $\uparrow \quad \uparrow \qquad\qquad \uparrow$

  Einteilchen-Operatoren Zweiteilchen-Operator

  Wie lässt sich H mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken?

1. Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha$ (z.B. $\hat{t}_\alpha = \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}$)

- Betrachte zunächst ein Einteilchen-System ($N = 1$) $\rightarrow$ $\hat{t}_\alpha = \hat{t}_1 \equiv \hat{t}$

  Sei $t_{ij} \equiv \langle i | \hat{t} | j \rangle$

4.3 Ein- und Mehrteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $$H = \sum_{\alpha=1}^{N} \Big(\underbrace{\frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}}_{\uparrow} + \underbrace{U(\vec{x}_\alpha)}_{\uparrow} \Big) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \underbrace{V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)}_{\uparrow}$$

  Einteilchen-Operatoren   Zweiteilchen-Operator

  Wie lässt sich H mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken?

1. Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha$ (z.B. $\hat{t}_\alpha = \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}$)

- Betrachte zunächst ein Einteilchen-System ($N = 1$) $\;\longrightarrow\;$ $\hat{t}_\alpha = \hat{t}_1 \equiv \hat{t}$

  Sei $\quad t_{ij} \equiv \langle i|\hat{t}|j\rangle$

  Dann gilt: $\hat{t} = \Big(\sum_i |i\rangle\langle i|\Big)\, \hat{t}\, \Big(\sum_j |j\rangle\langle j|\Big) = \sum_{ij} |i\rangle\, t_{ij}\, \langle j| = \sum_{ij} t_{ij}\, |i\rangle\langle j|$

4.3 Ein- und Mehrteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $H = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} + U(\vec{x}_\alpha) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$

  $\uparrow$ $\uparrow$ Einteilchen-Operatoren $\uparrow$ Zweiteilchen-Operator

  Wie lässt sich H mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken?

1. Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha$ (z.B. $\hat{t}_\alpha = \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m}$)

- Betrachte zunächst ein Einteilchen-System ($N = 1$) $\longrightarrow$ $\hat{t}_\alpha = \hat{t}_1 \equiv \hat{t}$

  Sei $t_{ij} \equiv \langle i | \hat{t} | j \rangle$

  Dann gilt: $\hat{t} = \left(\sum_i |i\rangle\langle i| \right) \hat{t} \left(\sum_j |j\rangle\langle j| \right) = \sum_{ij} |i\rangle\, t_{ij}\, \langle j| = \sum_{ij} t_{ij}\, |i\rangle\langle j|$

  $$\left(\Rightarrow \; \langle i | \hat{t} | j \rangle = \sum_{i'j'} t_{i'j'} \underbrace{\langle i | i' \rangle}_{\delta_{ii'}} \underbrace{\langle j' | j \rangle}_{\delta_{j'j}} = t_{ij} \quad \checkmark \right)$$

Einteilchen-System: $\hat{t} = \sum_{ij} t_{ij} \, |i\rangle \langle j|$

Einteilchen-System: $\hat{t} = \sum_{ij} t_{ij} \, |i\rangle \langle j|$

→ N-Teilchen-System: $\hat{T} = \sum_{\alpha=1}^{N} \hat{t}_\alpha = \sum_{ij} t_{ij} \sum_{\alpha=1}^{N} |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha$

Einteilchen-System: $\hat{t} = \sum_{ij} t_{ij} \, |i\rangle\langle j|$

→ N-Teilchen-System: $\hat{T} = \sum_{\alpha=1}^{N} \hat{t}_\alpha = \sum_{ij} t_{ij} \sum_{\alpha=1}^{N} |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha$

- $\sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha$ symmetrisch unter Permutationen der Teilchen

  $\Rightarrow \quad \left[P, \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha\right] = 0 \Rightarrow \quad \left[S_\pm, \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha\right] = 0$

Einteilchen-System: $\hat{t} = \sum_{ij} t_{ij} \, |i\rangle\langle j|$

$\rightarrow$ N-Teilchen-System: $\hat{T} = \sum_{\alpha=1}^{N} \hat{t}_\alpha = \sum_{ij} t_{ij} \sum_{\alpha=1}^{N} |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha$

- $\sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha$ symmetrisch unter Permutationen der Teilchen

  $\Rightarrow \quad \left[P, \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha\right] = 0 \Rightarrow \quad \left[S_\pm, \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha\right] = 0$

- Für Bosonen gilt dann:

$$\sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, ...\rangle = \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! ...}} S_+ |i_1, ... , i_N\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! ...}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1, ... , i_N\rangle$$

(mit einem entsprechenden N-Teilchen-Zustand $|i_1, ... , i_N\rangle$)

$$\Rightarrow \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, ...\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! ...}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1\rangle_1 \, ... \, |i_N\rangle_N$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, ...\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! ...}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1\rangle_1 \, ... \, |i_N\rangle_N$$

(i) $\underline{i \neq j}$:

$$= \underbrace{\sqrt{n_i + 1}\,\frac{1}{\sqrt{n_j}}}_{\text{richtige Normierung des neuen Zustands}} \quad \underbrace{n_j \, |..., n_i + 1, ..., n_j - 1, ...\rangle}_{\text{In } n_j \text{ Termen wird jeweils ein } |j\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ ersetzt.}}$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, ...\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! ...}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1\rangle_1 \, ... \, |i_N\rangle_N$$

(i) <u>$i \neq j$:</u>

$$= \underbrace{\sqrt{n_i + 1}\,\frac{1}{\sqrt{n_j}}}_{\text{richtige Normierung des neuen Zustands}} \quad \underbrace{n_j \, |..., n_i + 1, ..., n_j - 1, ...\rangle}_{\text{In } n_j \text{ Termen wird jeweils ein } |j\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ ersetzt.}}$$

$$= \sqrt{n_i + 1}\sqrt{n_j} \, |..., n_i + 1, ..., n_j - 1, ...\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, ...\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! ...}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1\rangle_1 \ldots |i_N\rangle_N$$

(i) $\underline{i \neq j}$:

$$= \underbrace{\sqrt{n_i + 1}\,\frac{1}{\sqrt{n_j}}}_{\text{richtige Normierung des neuen Zustands}} \quad \underbrace{n_j \, |\ldots, n_i + 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle}_{\text{In } n_j \text{ Termen wird jeweils ein } |j\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ ersetzt.}}$$

$$= \sqrt{n_i + 1}\sqrt{n_j} \, |\ldots, n_i + 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle$$

$$= a_i^\dagger \, a_j \, |\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \ldots}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1\rangle_1 \ldots |i_N\rangle_N$$

(i) <u>$i \neq j$:</u>

$$= \underbrace{\sqrt{n_i + 1} \, \frac{1}{\sqrt{n_j}}}_{\text{richtige Normierung des neuen Zustands}} \quad \underbrace{n_j \, |\ldots, n_i + 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle}_{\text{In } n_j \text{ Termen wird jeweils ein } |j\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ ersetzt.}}$$

$$= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j} \, |\ldots, n_i + 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle$$

$$= a_i^\dagger \, a_j \, |\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle$$

(ii) <u>$i = j$:</u>

$$= \underbrace{n_i \, |\ldots, n_i, \ldots\rangle}_{\text{In } n_i \text{ Termen wird jeweils ein } |i\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ „ersetzt".}}$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \ldots}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1\rangle_1 \ldots |i_N\rangle_N$$

(i) $\underline{i \neq j}$:

$$= \underbrace{\sqrt{n_i + 1}\,\frac{1}{\sqrt{n_j}}}_{\text{richtige Normierung des neuen Zustands}} \quad \underbrace{n_j \, |\ldots, n_i + 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle}_{\text{In } n_j \text{ Termen wird jeweils ein } |j\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ ersetzt.}}$$

$$= \sqrt{n_i + 1}\sqrt{n_j}\, |\ldots, n_i + 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle$$

$$= a_i^\dagger a_j \, |\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle$$

(ii) $\underline{i = j}$:

$$= \underbrace{n_i \, |\ldots, n_i, \ldots\rangle}_{\text{In } n_i \text{ Termen wird jeweils ein } |i\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ „ersetzt".}} \qquad = a_i^\dagger a_i \, |\ldots, n_i, \ldots\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!\ldots}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1\rangle_1 \ldots |i_N\rangle_N$$

(i) $\underline{i \neq j}$:

$$= \underbrace{\sqrt{n_i+1}\,\frac{1}{\sqrt{n_j}}}_{\text{richtige Normierung des neuen Zustands}} \quad \underbrace{n_j \, |\ldots, n_i+1, \ldots, n_j-1, \ldots\rangle}_{\text{In } n_j \text{ Termen wird jeweils ein } |j\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ ersetzt.}}$$

$$= \sqrt{n_i+1}\sqrt{n_j}\, |\ldots, n_i+1, \ldots, n_j-1, \ldots\rangle$$

$$= a_i^\dagger \, a_j \, |\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle$$

(ii) $\underline{i = j}$:

$$= \underbrace{n_i \, |\ldots, n_i, \ldots\rangle}_{\text{In } n_i \text{ Termen wird jeweils ein } |i\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ „ersetzt".}} \qquad = a_i^\dagger \, a_i \, |\ldots, n_i, \ldots\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha = a_i^\dagger \, a_j \quad \text{für beliebige } i, j.$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |n_1, n_2, ...\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! ...}} S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha \, |i_1\rangle_1 \ldots |i_N\rangle_N$$

(i) <u>$i \neq j$:</u>

$$= \underbrace{\sqrt{n_i + 1} \, \frac{1}{\sqrt{n_j}}}_{\text{richtige Normierung des neuen Zustands}} \quad \underbrace{n_j \, |\ldots, n_i + 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle}_{\text{In } n_j \text{ Termen wird jeweils ein } |j\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ ersetzt.}}$$

$$= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j} \, |\ldots, n_i + 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle$$

$$= a_i^\dagger \, a_j \, |\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle$$

(ii) <u>$i = j$:</u>

$$= \underbrace{n_i \, |\ldots, n_i, \ldots\rangle}_{\text{In } n_i \text{ Termen wird jeweils ein } |i\rangle \text{ durch } |i\rangle \text{ „ersetzt".}} \qquad = a_i^\dagger \, a_i \, |\ldots, n_i, \ldots\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha = a_i^\dagger \, a_j \quad \text{für beliebige } i, j.$$

Das gilt auch für Fermionen (s. Übung).

- Wir hatten: $\hat{T} = \sum_{ij} t_{ij} \sum_{\alpha=1}^{N} |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha, \qquad \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha = a_i^\dagger a_j$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\hat{T} = \sum_{ij} t_{ij}\, a_i^\dagger\, a_j \equiv \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle\, a_i^\dagger\, a_j}$$

- Wir hatten: $\hat{T} = \sum_{ij} t_{ij} \sum_{\alpha=1}^{N} |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha , \qquad \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha = a_i^\dagger a_j$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\hat{T} = \sum_{ij} t_{ij}\, a_i^\dagger\, a_j \equiv \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle\, a_i^\dagger\, a_j}$$

- Spezialfall: $t_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij}$

  (d.h. der Einteilchen-Operator ist bzgl. der Einteilchen-Basis diagonal)

  $$\Rightarrow \quad \hat{T} = \sum_i \varepsilon_i\, a_i^\dagger\, a_i = \sum_i \varepsilon_i\, \hat{n}_i$$

  Die Gesamtenergie nicht (mit einander) wechselwirkender Teilchen ist die Summe der Einteilchen-Energien.

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

2. Zweiteilchen-Operatoren: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}$ (z.B. $\hat{f}_{\alpha\beta} = V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$)

2. Zweiteilchen-Operatoren: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}$ (z.B. $\hat{f}_{\alpha\beta} = V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$)

- Schreibe analog zu den Einteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta$$

2. Zweiteilchen-Operatoren: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}$ (z.B. $\hat{f}_{\alpha\beta} = V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$)

- Schreibe analog zu den Einteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta$$

  - Bedeutung des Zweiteilchen-Matrixelements $\langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle$ $\rightarrow$ später

2. Zweiteilchen-Operatoren: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}$ (z.B. $\hat{f}_{\alpha\beta} = V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$)

- Schreibe analog zu den Einteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta$$

  - Bedeutung des Zweiteilchen-Matrixelements $\langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle$ ➞ später

- $\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\beta \langle n|_\beta$

2. Zweiteilchen-Operatoren: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}$ (z.B. $\hat{f}_{\alpha\beta} = V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$)

- Schreibe analog zu den Einteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta$$

  - Bedeutung des Zweiteilchen-Matrixelements $\langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle$ $\rightarrow$ später

- $$\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\beta \langle n|_\beta$$
$$= \sum_{\alpha, \beta} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\beta \langle n|_\beta - \sum_{\alpha} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\alpha \langle n|_\alpha$$

2. Zweiteilchen-Operatoren: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}$ (z.B. $\hat{f}_{\alpha\beta} = V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$)

- Schreibe analog zu den Einteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta$$

  - Bedeutung des Zweiteilchen-Matrixelements $\langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle$ → später

- $$\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\beta \langle n|_\beta$$
$$= \sum_{\alpha,\beta} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\beta \langle n|_\beta - \sum_{\alpha} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\alpha \langle n|_\alpha$$
$$= \sum_{\alpha} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \sum_{\beta} |j\rangle_\beta \langle n|_\beta - \sum_{\alpha} |i\rangle_\alpha \underbrace{\langle m|j\rangle}_{\delta_{mj}} \langle n|_\alpha$$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

2. Zweiteilchen-Operatoren: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}$ (z.B. $\hat{f}_{\alpha\beta} = V(\vec{x}_\alpha, \vec{x}_\beta)$)

- Schreibe analog zu den Einteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta$$

  - Bedeutung des Zweiteilchen-Matrixelements $\langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle$ $\rightarrow$ später

- $$\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\beta \langle n|_\beta$$

$$= \sum_{\alpha,\beta} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\beta \langle n|_\beta - \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \; |j\rangle_\alpha \langle n|_\alpha$$

$$= \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \sum_\beta |j\rangle_\beta \langle n|_\beta - \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \underbrace{\langle m|j\rangle}_{\delta_{mj}} \langle n|_\alpha$$

$$= a_i^\dagger a_m \, a_j^\dagger a_n - a_i^\dagger \delta_{mj} \, a_n$$

- $\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = a_i^\dagger a_m a_j^\dagger a_n - a_i^\dagger \delta_{mj} a_n$

- $\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = a_i^\dagger a_m a_j^\dagger a_n - a_i^\dagger \delta_{mj} a_n$
- $\delta_{mj} = \begin{cases} \left[a_m, a_j^\dagger\right] & \text{für Bosonen} \\ \left\{a_m, a_j^\dagger\right\} & \text{für Fermionen} \end{cases}$

- $\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = a_i^\dagger a_m a_j^\dagger a_n - a_i^\dagger \delta_{mj} a_n = \pm a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_n$

- $\delta_{mj} = \begin{cases} \left[a_m, a_j^\dagger\right] & \text{für Bosonen} \\ \left\{a_m, a_j^\dagger\right\} & \text{für Fermionen} \end{cases}$

- $\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = a_i^\dagger a_m \, a_j^\dagger a_n - a_i^\dagger \delta_{mj} \, a_n \; = \pm a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_n \; = a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$
- $\delta_{mj} = \begin{cases} \left[a_m, a_j^\dagger\right] & \text{für Bosonen} \\ \{a_m, a_j^\dagger\} & \text{für Fermionen} \end{cases}$

- $\sum_{\alpha\neq\beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = a_i^\dagger a_m a_j^\dagger a_n - a_i^\dagger \delta_{mj} a_n = \pm a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_n = a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$
- $\delta_{mj} = \begin{cases} \left[a_m, a_j^\dagger\right] & \text{für Bosonen} \\ \left\{a_m, a_j^\dagger\right\} & \text{für Fermionen} \end{cases}$
- $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i,j|\hat{f}|m,n\rangle \sum_{\alpha\neq\beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta$

- $\sum_{\alpha\neq\beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta = a_i^\dagger a_m \, a_j^\dagger a_n - a_i^\dagger \delta_{mj} \, a_n = \pm a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_n = a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$

- $\delta_{mj} = \begin{cases} \left[a_m, a_j^\dagger\right] & \text{für Bosonen} \\ \left\{a_m, a_j^\dagger\right\} & \text{für Fermionen} \end{cases}$

- $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i,j|\hat{f}|m,n\rangle \sum_{\alpha\neq\beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\alpha \langle n|_\beta$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i,j|\hat{f}|m,n\rangle \; a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m}$$

Zweiteilchen-Matrixelemente

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{e^2}{|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|}$, $\quad \hat{\vec{x}}_\lambda$: Ortsop. für Teilchen λ

Zweiteilchen-Matrixelemente

- Beispiel: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{e^2}{|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|}$, $\quad \hat{\vec{x}}_\lambda$: Ortsop. für Teilchen λ

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta} \quad \Rightarrow \quad \hat{f}_{\alpha\beta} = \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta)$$

Zweiteilchen-Matrixelemente

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $\hat{F} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta) = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} \frac{e^2}{|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|}$, $\quad \hat{\vec{x}}_\lambda$: Ortsop. für Teilchen λ

$$= \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} \hat{f}_{\alpha\beta} \quad \Rightarrow \quad \hat{f}_{\alpha\beta} = \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta)$$

- Zweiteilchen-Matrixelemente im Ortsraum:

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{V}(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{1. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(1)}}, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{2. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(2)}}) | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle$$

Zweiteilchen-Matrixelemente

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $\hat{F} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta) = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\frac{e^2}{|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|}$, $\quad \hat{\vec{x}}_\lambda$: Ortsop. für Teilchen λ

$$= \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\hat{f}_{\alpha\beta} \quad \Rightarrow \quad \hat{f}_{\alpha\beta} = \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta)$$

- Zweiteilchen-Matrixelemente im Ortsraum:

$$\langle\vec{x}_1, \vec{x}_2|\,\hat{V}(\underset{\substack{\uparrow\\ \text{1. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(1)}}, \underset{\substack{\uparrow\\ \text{2. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(2)}})|\vec{x}_3, \vec{x}_4\rangle \qquad = \quad V(\vec{x}_3, \vec{x}_4)\,\langle\vec{x}_1, \vec{x}_2|\vec{x}_3, \vec{x}_4\rangle$$

Zweiteilchen-Matrixelemente

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $\hat{F} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta) = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} \frac{e^2}{|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|}$, $\quad \hat{\vec{x}}_\lambda$: Ortsop. für Teilchen λ

$$= \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} \hat{f}_{\alpha\beta} \quad \Rightarrow \quad \hat{f}_{\alpha\beta} = \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta)$$

- Zweiteilchen-Matrixelemente im Ortsraum:

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{V}(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{1. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(1)}}, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{2. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(2)}}) | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle = V(\vec{x}_3, \vec{x}_4)\, \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle$$

$$= V(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\, \delta^3(\vec{x}_1 - \vec{x}_3)\delta^3(\vec{x}_2 - \vec{x}_4)$$

Zweiteilchen-Matrixelemente

- Beispiel: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{e^2}{|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|}$, $\quad \hat{\vec{x}}_\lambda$: Ortsop. für Teilchen λ

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta} \quad \Rightarrow \quad \hat{f}_{\alpha\beta} = \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta)$$

- Zweiteilchen-Matrixelemente im Ortsraum:

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{V}(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{1. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(1)}}, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{2. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(2)}}) | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle = V(\vec{x}_3, \vec{x}_4) \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle$$

$$= V(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\, \delta^3(\vec{x}_1 - \vec{x}_3) \delta^3(\vec{x}_2 - \vec{x}_4)$$

- allgemeine Zweiteilchen-Matrixelemente:

$$\langle i, j, | \hat{f} | m, n \rangle = \int d^3x_1 \dots d^3x_4 \langle i | \vec{x}_1 \rangle \langle j | \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{f} | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle \langle \vec{x}_3 | m \rangle \langle \vec{x}_4 | n \rangle$$

Zweiteilchen-Matrixelemente

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{e^2}{|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|}$, $\quad \hat{\vec{x}}_\lambda$: Ortsop. für Teilchen λ

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta} \quad \Rightarrow \quad \hat{f}_{\alpha\beta} = \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta)$$

- Zweiteilchen-Matrixelemente im Ortsraum:

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{V}(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{1. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(1)}}, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{2. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(2)}}) | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle = V(\vec{x}_3, \vec{x}_4) \, \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle$$

$$= V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \, \delta^3(\vec{x}_1 - \vec{x}_3) \delta^3(\vec{x}_2 - \vec{x}_4)$$

- allgemeine Zweiteilchen-Matrixelemente:

$$\langle i, j, | \hat{f} | m, n \rangle = \int d^3x_1 \ldots d^3x_4 \langle i | \vec{x}_1 \rangle \langle j | \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{f} | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle \langle \vec{x}_3 | m \rangle \langle \vec{x}_4 | n \rangle$$

$$= \int d^3x_1 \ldots d^3x_4 \, \varphi_i^*(\vec{x}_1) \, \varphi_j^*(\vec{x}_2) \, \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{V}(\hat{\vec{x}}_{(1)}, \hat{\vec{x}}_{(2)}) | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle \, \varphi_m(\vec{x}_3) \, \varphi_n(\vec{x}_4)$$

Zweiteilchen-Matrixelemente

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{e^2}{|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|}$, $\quad \hat{\vec{x}}_\lambda$: Ortsop. für Teilchen λ

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta} \quad \Rightarrow \quad \hat{f}_{\alpha\beta} = \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta)$$

- Zweiteilchen-Matrixelemente im Ortsraum:

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{V}(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{1. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(1)}}, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{2. Teilchen}}}{\hat{\vec{x}}_{(2)}}) | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle = V(\vec{x}_3, \vec{x}_4) \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle$$

$$= V(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\, \delta^3(\vec{x}_1 - \vec{x}_3) \delta^3(\vec{x}_2 - \vec{x}_4)$$

- allgemeine Zweiteilchen-Matrixelemente:

$$\langle i, j, | \hat{f} | m, n \rangle = \int d^3x_1 \dots d^3x_4 \langle i | \vec{x}_1 \rangle \langle j | \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{f} | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle \langle \vec{x}_3 | m \rangle \langle \vec{x}_4 | n \rangle$$

$$= \int d^3x_1 \dots d^3x_4\, \varphi_i^*(\vec{x}_1)\, \varphi_j^*(\vec{x}_2)\, \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \hat{V}(\hat{\vec{x}}_{(1)}, \hat{\vec{x}}_{(2)}) | \vec{x}_3, \vec{x}_4 \rangle\, \varphi_m(\vec{x}_3)\, \varphi_n(\vec{x}_4)$$

$$= \int d^3x_1 d^3x_2\, \varphi_i^*(\vec{x}_1)\, \varphi_j^*(\vec{x}_2)\, V(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\, \varphi_m(\vec{x}_1)\, \varphi_n(\vec{x}_2)$$

Zusammenfassung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Hamilton-Operator:

$$H = \sum_{\alpha} \left(\hat{t}_\alpha + \hat{U}(\hat{\vec{x}}_\alpha)\right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}(\hat{\vec{x}}_\alpha, \hat{\vec{x}}_\beta)$$

$$= \sum_{ij} \left(t_{ij} + U_{ij}\right) a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijmn} V_{ijmn}\, a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$$

- Einteilchen-Matrixelemente:
  - $t_{ij} \equiv \langle i|\hat{t}|j\rangle$
  - $U_{ij} \equiv \langle i|\hat{U}(\hat{\vec{x}})|j\rangle = \int d^3x\, \varphi_i^*(\vec{x})\, U(\vec{x})\, \varphi_j(\vec{x})$,

    φ: Einteilchen-Ortsraum-Wellenfkt.
- Zweiteilchen-Matrixelemente:
  - $V_{ijmn} \equiv \langle i, j|\hat{V}(\hat{\vec{x}}_{(1)}, \hat{\vec{x}}_{(2)},)|m, n\rangle$

    $= \int d^3x_1 d^3x_2\, \varphi_i^*(\vec{x}_1)\, \varphi_j^*(\vec{x}_2)\, V(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\, \varphi_m(\vec{x}_1)\, \varphi_n(\vec{x}_2)$

4.4 Feldoperatoren

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

4.4 Feldoperatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- zwei vollständige Einteilchenbasis-Systeme: $\{|i\rangle\}, \{|\lambda\rangle\}$

4.4 Feldoperatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- zwei vollständige Einteilchenbasis-Systeme: $\{|i\rangle\}, \ \{|\lambda\rangle\}$
- Basiswechsel: $|\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\lambda\rangle$

4.4 Feldoperatoren

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- zwei vollständige Einteilchenbasis-Systeme: $\{|i\rangle\},\ \{|\lambda\rangle\}$
- Basiswechsel: $a_\lambda^\dagger|0\rangle = |\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\lambda\rangle = \sum_i \langle i|\lambda\rangle a_i^\dagger|0\rangle$

4.4 Feldoperatoren

- zwei vollständige Einteilchenbasis-Systeme: $\{|i\rangle\}, \ \{|\lambda\rangle\}$
- Basiswechsel: $a_\lambda^\dagger|0\rangle = |\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\lambda\rangle = \sum_i \langle i|\lambda\rangle a_i^\dagger|0\rangle$

$\rightarrow \ a_\lambda^\dagger = \sum_i \langle i|\lambda\rangle \, a_i^\dagger = \sum_i \langle\lambda|i\rangle^* \, a_i^\dagger$

4.4 Feldoperatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- zwei vollständige Einteilchenbasis-Systeme: $\{|i\rangle\}, \; \{|\lambda\rangle\}$
- Basiswechsel: $a^\dagger_\lambda|0\rangle = |\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\lambda\rangle = \sum_i \langle i|\lambda\rangle a^\dagger_i|0\rangle$

$$\rightarrow \; a^\dagger_\lambda = \sum_i \langle i|\lambda\rangle \, a^\dagger_i = \sum_i \langle\lambda|i\rangle^* \, a^\dagger_i \qquad \Rightarrow \; a_\lambda = \sum_i \langle\lambda|i\rangle \, a_i$$

4.4 Feldoperatoren

- zwei vollständige Einteilchenbasis-Systeme: $\{|i\rangle\}$, $\{|\lambda\rangle\}$
- Basiswechsel: $a^\dagger_\lambda|0\rangle = |\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\lambda\rangle = \sum_i \langle i|\lambda\rangle a^\dagger_i|0\rangle$

  $\rightarrow\ a^\dagger_\lambda = \sum_i \langle i|\lambda\rangle\, a^\dagger_i = \sum_i \langle\lambda|i\rangle^*\, a^\dagger_i \quad \Rightarrow\ a_\lambda = \sum_i \langle\lambda|i\rangle\, a_i$
- wichtiger Spezialfall:

  $\{|\lambda\rangle\} = \{|\vec{x}\rangle\}$ (Ortsraum-Eigenzustände), $\langle\vec{x}|i\rangle = \varphi_i(\vec{x})$

4.4 Feldoperatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- zwei vollständige Einteilchenbasis-Systeme: $\{|i\rangle\}, \; \{|\lambda\rangle\}$

- Basiswechsel: $a_\lambda^\dagger|0\rangle = |\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\lambda\rangle = \sum_i \langle i|\lambda\rangle a_i^\dagger|0\rangle$

  $\rightarrow \; a_\lambda^\dagger = \sum_i \langle i|\lambda\rangle\, a_i^\dagger = \sum_i \langle\lambda|i\rangle^*\, a_i^\dagger \qquad \Rightarrow \; a_\lambda = \sum_i \langle\lambda|i\rangle\, a_i$

- wichtiger Spezialfall:

  $\{|\lambda\rangle\} = \{|\vec{x}\rangle\}$ (Ortsraum-Eigenzustände), $\quad \langle\vec{x}|i\rangle = \varphi_i(\vec{x})$

  $\rightarrow$ „Feldoperatoren”: $\quad \psi(\vec{x}) \equiv a_{\vec{x}} = \sum_i \varphi_i(\vec{x})\, a_i,$

$$\psi^\dagger(\vec{x}) \equiv a_{\vec{x}}^\dagger = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\, a_i^\dagger$$

Interpretation

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\, a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$

Interpretation

- $\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\,a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$
- Teilchenzahl:

$$\hat{N}\,\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_j a_j^\dagger a_j \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\,a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{x})\,a_j^\dagger a_j a_i^\dagger\,|0\rangle$$

Interpretation

- $\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\, a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$
- Teilchenzahl:

  $$\hat{N}\,\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_j a_j^\dagger a_j \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\, a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{x})\, a_j^\dagger a_j a_i^\dagger\,|0\rangle$$

  - Bosonen: $\quad a_j a_i^\dagger\,|0\rangle = a_i^\dagger\,\underbrace{a_j|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\left[a_j, a_i^\dagger\right]}_{=\delta_{ji}}\,|0\rangle = \delta_{ji}\,|0\rangle$
  - Fermionen: $\quad a_j a_i^\dagger\,|0\rangle = -a_i^\dagger\,\underbrace{a_j|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\left\{a_j, a_i^\dagger\right\}}_{=\delta_{ji}}\,|0\rangle = \delta_{ji}\,|0\rangle$

Interpretation

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\, a_i^\dagger\, |0\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$
- Teilchenzahl:

  $$\hat{N}\,\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_j a_j^\dagger a_j \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\, a_i^\dagger\, |0\rangle = \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{x})\, a_j^\dagger a_j a_i^\dagger\, |0\rangle$$

  - Bosonen: $a_j a_i^\dagger\,|0\rangle = a_i^\dagger \underbrace{a_j|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\left[a_j, a_i^\dagger\right]}_{=\delta_{ji}}\,|0\rangle = \delta_{ji}\,|0\rangle$
  - Fermionen: $a_j a_i^\dagger\,|0\rangle = -a_i^\dagger \underbrace{a_j|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\left\{a_j, a_i^\dagger\right\}}_{=\delta_{ji}}\,|0\rangle = \delta_{ji}\,|0\rangle$

  $$\Rightarrow \quad \hat{N}\,\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\, a_i^\dagger\,|0\rangle = \psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle$$

Interpretation

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\,a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$
- Teilchenzahl:

$$\hat{N}\,\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_j a_j^\dagger a_j \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\,a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{x})\,a_j^\dagger a_j a_i^\dagger\,|0\rangle$$

  - Bosonen: $a_j a_i^\dagger\,|0\rangle = a_i^\dagger\,\underbrace{a_j|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\left[a_j, a_i^\dagger\right]}_{=\delta_{ji}}\,|0\rangle = \delta_{ji}\,|0\rangle$
  - Fermionen: $a_j a_i^\dagger\,|0\rangle = -a_i^\dagger\,\underbrace{a_j|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\left\{a_j, a_i^\dagger\right\}}_{=\delta_{ji}}\,|0\rangle = \delta_{ji}\,|0\rangle$

$$\Rightarrow \quad \hat{N}\,\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\,a_i^\dagger\,|0\rangle = \psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle \qquad \Rightarrow \quad N = 1$$

Interpretation

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\,a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$
- Teilchenzahl:

$$\hat{N}\,\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_j a_j^\dagger a_j \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\,a_i^\dagger\,|0\rangle = \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{x})\,a_j^\dagger a_j a_i^\dagger\,|0\rangle$$

  - Bosonen: $a_j a_i^\dagger\,|0\rangle = a_i^\dagger\,\underbrace{a_j|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\left[a_j, a_i^\dagger\right]}_{=\delta_{ji}}\,|0\rangle = \delta_{ji}\,|0\rangle$
  - Fermionen: $a_j a_i^\dagger\,|0\rangle = -a_i^\dagger\,\underbrace{a_j|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\left\{a_j, a_i^\dagger\right\}}_{=\delta_{ji}}\,|0\rangle = \delta_{ji}\,|0\rangle$

$$\Rightarrow \quad \hat{N}\,\psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\,a_i^\dagger\,|0\rangle = \psi^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle \qquad \Rightarrow \quad N = 1$$

→ $\psi^\dagger(\vec{x})$ erzeugt ein Teilchen am Ort $\vec{x}$.

Analog vernichtet $\psi(\vec{x})$ ein Teilchen am Ort $\vec{x}$.

Kommutator-Relationen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Notation zur gemeinsamen Behandlung von Bosonen und Fermionen:

$$\left[A, B\right]_{\pm} \equiv AB \pm BA \quad \Rightarrow \quad \left[A, B\right]_{+} \equiv \{A, B\}, \quad \left[A, B\right]_{-} \equiv \left[A, B\right]$$

Kommutator-Relationen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Notation zur gemeinsamen Behandlung von Bosonen und Fermionen:

$$\big[A, B\big]_{\pm} \equiv AB \pm BA \quad \Rightarrow \quad \big[A, B\big]_{+} \equiv \{A, B\}, \quad \big[A, B\big]_{-} \equiv \big[A, B\big]$$

- $\big[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}')\big]_{\pm} = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j(\vec{x}') \underbrace{[a_i, a_j]_{\pm}}_{=0} = 0$

Kommutator-Relationen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Notation zur gemeinsamen Behandlung von Bosonen und Fermionen:

$$\left[A, B\right]_\pm \equiv AB \pm BA \quad \Rightarrow \left[A, B\right]_+ \equiv \{A, B\}, \quad \left[A, B\right]_- \equiv \left[A, B\right]$$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}')\right]_\pm = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j(\vec{x}') \underbrace{[a_i, a_j]_\pm}_{=0} = 0$

- analog: $\left[\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = 0$

Kommutator-Relationen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Notation zur gemeinsamen Behandlung von Bosonen und Fermionen:

$$\left[A, B\right]_\pm \equiv AB \pm BA \quad \Rightarrow \quad \left[A, B\right]_+ \equiv \{A, B\}, \quad \left[A, B\right]_- \equiv \left[A, B\right]$$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}\,')\right]_\pm = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j(\vec{x}\,')\, \underbrace{[a_i, a_j]_\pm}_{=0} = 0$

- analog: $\left[\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}\,')\right]_\pm = 0$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}\,')\right]_\pm = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j^*(\vec{x}\,')\, \underbrace{[a_i, a_j^\dagger]_\pm}_{=\delta_{ij}}$

Kommutator-Relationen

- Notation zur gemeinsamen Behandlung von Bosonen und Fermionen:

$$\left[A, B\right]_{\pm} \equiv AB \pm BA \quad \Rightarrow \; \left[A, B\right]_{+} \equiv \{A, B\}, \quad \left[A, B\right]_{-} \equiv \left[A, B\right]$$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}')\right]_{\pm} = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j(\vec{x}') \underbrace{[a_i, a_j]_{\pm}}_{=0} = 0$

- analog: $\left[\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}')\right]_{\pm} = 0$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}')\right]_{\pm} = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j^*(\vec{x}') \underbrace{[a_i, a_j^\dagger]_{\pm}}_{=\delta_{ij}}$

$$= \sum_{i} \varphi_i(\vec{x})\varphi_i^*(\vec{x}')$$

Kommutator-Relationen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Notation zur gemeinsamen Behandlung von Bosonen und Fermionen:

$$\left[A, B\right]_\pm \equiv AB \pm BA \quad \Rightarrow \left[A, B\right]_+ \equiv \{A, B\}, \quad \left[A, B\right]_- \equiv \left[A, B\right]$$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}')\right]_\pm = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j(\vec{x}') \underbrace{[a_i, a_j]_\pm}_{=0} = 0$

- analog: $\left[\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = 0$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j^*(\vec{x}') \underbrace{[a_i, a_j^\dagger]_\pm}_{=\delta_{ij}}$

$$= \sum_i \varphi_i(\vec{x})\varphi_i^*(\vec{x}') = \sum_i \langle\vec{x}|i\rangle\langle i|\vec{x}'\rangle$$

Kommutator-Relationen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Notation zur gemeinsamen Behandlung von Bosonen und Fermionen:

$$\left[A, B\right]_{\pm} \equiv AB \pm BA \quad \Rightarrow \quad \left[A, B\right]_{+} \equiv \{A, B\}, \qquad \left[A, B\right]_{-} \equiv \left[A, B\right]$$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}\,')\right]_{\pm} = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j(\vec{x}\,')\, \underbrace{[a_i, a_j]_{\pm}}_{=0} = 0$

- analog: $\left[\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}\,')\right]_{\pm} = 0$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}\,')\right]_{\pm} = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j^*(\vec{x}\,')\, \underbrace{[a_i, a_j^\dagger]_{\pm}}_{=\delta_{ij}}$

$$= \sum_{i} \varphi_i(\vec{x})\varphi_i^*(\vec{x}\,') \quad = \sum_i \langle\vec{x}|i\rangle\langle i|\vec{x}\,'\rangle \quad = \langle\vec{x}|\vec{x}\,'\rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}\,')$$

Kommutator-Relationen

- Notation zur gemeinsamen Behandlung von Bosonen und Fermionen:

$$\left[A, B\right]_{\pm} \equiv AB \pm BA \quad \Rightarrow \quad \left[A, B\right]_{+} \equiv \{A, B\}, \quad \left[A, B\right]_{-} \equiv \left[A, B\right]$$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}')\right]_{\pm} = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j(\vec{x}') \underbrace{[a_i, a_j]_{\pm}}_{=0} = 0$

- analog: $\left[\psi^{\dagger}(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}')\right]_{\pm} = 0$

- $\left[\psi(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}')\right]_{\pm} = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j^{*}(\vec{x}') \underbrace{[a_i, a_j^{\dagger}]_{\pm}}_{=\delta_{ij}}$

$$= \sum_{i} \varphi_i(\vec{x})\varphi_i^{*}(\vec{x}') \;=\; \sum_{i} \langle \vec{x}|i\rangle\langle i|\vec{x}'\rangle \;=\; \langle \vec{x}|\vec{x}'\rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\left[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}')\right]_{\pm} = \left[\psi^{\dagger}(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}')\right]_{\pm} = 0, \quad \left[\psi(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}')\right]_{\pm} = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')}$$

(+ für Fermionen, $-$ für Bosonen)

Einteilchen- und Zweiteilchen-Operatoren

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- kinetische Energie:

$$\hat{T} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle \, a_i^\dagger a_j$$

Einteilchen- und Zweiteilchen-Operatoren

- kinetische Energie:

$$\hat{T} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle \, a_i^\dagger a_j \; = \sum_{ij} \int d^3x \int d^3x' \, \underbrace{\langle i|\vec{x}'\rangle}_{\varphi_i^*(\vec{x}')} \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle \underbrace{\langle \vec{x}|j\rangle}_{\varphi_j(\vec{x})} \, a_i^\dagger a_j$$

Einteilchen- und Zweiteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- kinetische Energie:

$$\hat{T} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle \, a_i^\dagger a_j = \sum_{ij} \int d^3x \int d^3x' \, \underbrace{\langle i|\vec{x}'\rangle}_{\varphi_i^*(\vec{x}')} \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle \underbrace{\langle \vec{x}|j\rangle}_{\varphi_j(\vec{x})} \, a_i^\dagger a_j$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \, \psi^\dagger(\vec{x}') \, \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle \, \psi(\vec{x})$$

Einteilchen- und Zweiteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- kinetische Energie:

$$\hat{T} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle\, a_i^\dagger a_j = \sum_{ij} \int d^3x \int d^3x' \underbrace{\langle i|\vec{x}'\rangle}_{\varphi_i^*(\vec{x}')} \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle \underbrace{\langle \vec{x}|j\rangle}_{\varphi_j(\vec{x})} a_i^\dagger a_j$$

$$= \int d^3x \int d^3x'\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle\, \psi(\vec{x})$$

$$\hat{t} = \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \underbrace{\langle \vec{x}'|\vec{k}'\rangle}_{e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}'}} \underbrace{\langle \vec{k}'|\hat{t}|\vec{k}\rangle}_{\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}(2\pi)^3\delta^3(\vec{k}'-\vec{k})} \underbrace{\langle \vec{k}|\vec{x}\rangle}_{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}}$$

Einteilchen- und Zweiteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- kinetische Energie:

$$\hat{T} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle \, a_i^\dagger a_j = \sum_{ij} \int d^3x \int d^3x' \, \underbrace{\langle i|\vec{x}'\rangle}_{\varphi_i^*(\vec{x}')} \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle \underbrace{\langle \vec{x}|j\rangle}_{\varphi_j(\vec{x})} \, a_i^\dagger a_j$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \, \psi^\dagger(\vec{x}') \, \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle \, \psi(\vec{x})$$

$$\hat{t} = \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \underbrace{\langle \vec{x}'|\vec{k}'\rangle}_{e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}'}} \underbrace{\langle \vec{k}'|\hat{t}|\vec{k}\rangle}_{\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}(2\pi)^3\delta^3(\vec{k}'-\vec{k})} \underbrace{\langle \vec{k}|\vec{x}\rangle}_{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}}$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} \, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}$$

Einteilchen- und Zweiteilchen-Operatoren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- kinetische Energie:

$$\hat{T} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle\, a_i^\dagger a_j \;= \sum_{ij} \int d^3x \int d^3x' \,\underbrace{\langle i|\vec{x}'\rangle}_{\varphi_i^*(\vec{x}')} \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle \underbrace{\langle \vec{x}|j\rangle}_{\varphi_j(\vec{x})}\, a_i^\dagger a_j$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle\, \psi(\vec{x})$$

$$\hat{t} = \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \langle \vec{x}'|\hat{t}|\vec{x}\rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \underbrace{\langle \vec{x}'|\vec{k}'\rangle}_{e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}'}} \quad \underbrace{\langle \vec{k}'|\hat{t}|\vec{k}\rangle}_{\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}(2\pi)^3\delta^3(\vec{k}'-\vec{k})} \quad \underbrace{\langle \vec{k}|\vec{x}\rangle}_{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}}$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \, \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{T} = \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} \psi(\vec{x})$$

$$\hat{T} = \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\psi(\vec{x})$$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$\hat{T} = \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\ \psi^\dagger(\vec{x}')\ \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\ e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\psi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\ \psi^\dagger(\vec{x}')\ \Big(-\ \frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}\ e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\Big)\psi(\vec{x})$$

$$\hat{T} = \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\psi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\right)\psi(\vec{x})$$

zweimal partiell integrieren:

$$= \int d^3x \int d^3x' \underbrace{\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}}_{\delta^3(\vec{x}'-\vec{x})}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\,(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m})\,\psi(\vec{x})$$

$$\hat{T} = \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\psi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\right)\psi(\vec{x})$$

zweimal partiell integrieren:

$$= \int d^3x \int d^3x' \underbrace{\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}}_{\delta^3(\vec{x}'-\vec{x})} \psi^\dagger(\vec{x}')\,(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m})\,\psi(\vec{x})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\, \psi^\dagger(\vec{x})\,\vec{\nabla}^2\,\psi(\vec{x})$$

$$\hat{T} = \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\psi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}\right)\psi(\vec{x})$$

zweimal partiell integrieren:

$$= \int d^3x \int d^3x' \underbrace{\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}}_{\delta^3(\vec{x}'-\vec{x})} \psi^\dagger(\vec{x}')\,(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m})\,\psi(\vec{x})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\psi^\dagger(\vec{x})\,\vec{\nabla}^2\,\psi(\vec{x}) \overset{\text{part. Int.}}{=} \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\,\left(\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{x})\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\psi(\vec{x})\right)$$

$$\hat{T} = \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} \psi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}') \left(- \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} \right) \psi(\vec{x})$$

zweimal partiell integrieren:

$$= \int d^3x \int d^3x' \underbrace{\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}}_{\delta^3(\vec{x}'-\vec{x})} \psi^\dagger(\vec{x}') \left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\right) \psi(\vec{x})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x})\, \vec{\nabla}^2\, \psi(\vec{x}) \overset{\text{part. Int.}}{=} \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \left(\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{x})\right) \cdot \left(\vec{\nabla}\psi(\vec{x})\right)$$

- Einteilchenpotenzial (analog, aber einfacher):

$$\hat{U} = \sum_{ij} \langle i | \hat{U}(\hat{\vec{x}}) | j \rangle\, a_i^\dagger a_j = \int d^3x \int d^3x'\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \underbrace{\langle \vec{x}' | \hat{U}(\hat{\vec{x}}) | \vec{x} \rangle}_{U(\vec{x})\delta(\vec{x}'-\vec{x})}\, \psi(\vec{x})$$

$$\hat{T} = \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} \psi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \psi^\dagger(\vec{x}') \left(- \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} \right) \psi(\vec{x})$$

zweimal partiell integrieren:

$$= \int d^3x \int d^3x' \underbrace{\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}}_{\delta^3(\vec{x}'-\vec{x})} \psi^\dagger(\vec{x}') \left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\right) \psi(\vec{x})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x})\, \vec{\nabla}^2\, \psi(\vec{x}) \overset{\text{part. Int.}}{=} \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \left(\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{x}) \right) \cdot \left(\vec{\nabla}\psi(\vec{x}) \right)$$

- Einteilchenpotenzial (analog, aber einfacher):

$$\hat{U} = \sum_{ij} \langle i | \hat{U}(\hat{\vec{x}}) | j \rangle\, a_i^\dagger a_j = \int d^3x \int d^3x'\, \psi^\dagger(\vec{x}')\, \underbrace{\langle \vec{x}' | \hat{U}(\hat{\vec{x}}) | \vec{x} \rangle}_{U(\vec{x})\delta(\vec{x}'-\vec{x})}\, \psi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x\, \psi^\dagger(\vec{x})\, U(\vec{x})\, \psi(\vec{x})$$

- Zweiteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle \, a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \int d^3x_1 d^3x_2 \, \varphi_i^*(\vec{x}_1) \, \varphi_j^*(\vec{x}_2) \, V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \, \varphi_m(\vec{x}_1) \, \varphi_n(\vec{x}_2) \, a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Zweiteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle i, j | \hat{f} | m, n \rangle \, a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \int d^3x_1 d^3x_2 \, \varphi_i^*(\vec{x}_1) \, \varphi_j^*(\vec{x}_2) \, V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \, \varphi_m(\vec{x}_1) \, \varphi_n(\vec{x}_2) \, a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$$

$$= \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \, \psi^\dagger(\vec{x}_1) \, \psi^\dagger(\vec{x}_2) \, V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \, \psi(\vec{x}_1) \, \psi(\vec{x}_2)$$

- Zweiteilchen-Operatoren:

$$\hat{F} = \frac{1}{2}\sum_{ijmn} \langle i,j|\hat{f}|m,n\rangle\, a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{ijmn} \int d^3x_1 d^3x_2\, \varphi_i^*(\vec{x}_1)\, \varphi_j^*(\vec{x}_2)\, V(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\, \varphi_m(\vec{x}_1)\, \varphi_n(\vec{x}_2)\, a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m$$

$$= \frac{1}{2}\int d^3x_1 d^3x_2\, \psi^\dagger(\vec{x}_1)\, \psi^\dagger(\vec{x}_2)\, V(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\, \psi(\vec{x}_1)\, \psi(\vec{x}_2)$$

→ Hamilton-Operator:

$$H = \int d^3x \left(\frac{\hbar^2}{2m} \big(\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{x})\big) \cdot \big(\vec{\nabla}\psi(\vec{x})\big) + \psi^\dagger(\vec{x})\, U(\vec{x})\, \psi(\vec{x}) \right)$$

$$+\frac{1}{2}\int d^3x_1 d^3x_2\, \psi^\dagger(\vec{x}_1)\, \psi^\dagger(\vec{x}_2)\, V(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\, \psi(\vec{x}_1)\, \psi(\vec{x}_2)$$